

Аналитическая химия и химический анализ

Аналитическую химию часто отождествляют с химическим анализом. Вместе с тем между аналитической химией и химическим анализом примерно такие же отношения, как между медицинской наукой и врачебной практикой.

Современную аналитическую химию можно определить как науку, развивающую общую методологию, методы и средства изучения химического состава вещества и разрабатывающую методы анализа различных объектов, а химический анализ — как получение информации о химическом составе вещества.

Химический анализ — важнейшее средство оценки качества разнообразной продукции, контроля объектов окружающей среды и технологических процессов, диагностики в медицине. Его постоянно используют в криминалистических исследованиях и в военном деле. На результатах химического анализа в значительной степени базируются выводы многих наук, например молекулярной биологии, геохимии, химической кинетики.

Объемы осуществляемых в мире анализов можно косвенно оценить, если вспомнить хотя бы некоторые массовые анализы — определение углерода, фосфора и серы в выплавляемой стали; ароматических углеводородов и серы в нефтях и нефтепродуктах; монооксида углерода и углеводородов в автомобильных выхлопах; хлора в плавательных бассейнах; значения pH почв; влажности зерна и жирности молока; анализ крови и мочи в клиниках.

Задачи, стоящие перед химическим анализом, а следовательно, и перед аналитической химией как наукой, постоянно множатся и усложняются. Непрерывно растет число объектов анализа. Кто бы мог предположить в середине XX века, что объекты молекулярной биологии, биохимии, биотехнологии, да и современной медицины займут такое важное место в системе объектов аналитического исследования; что встанет задача анализа сложных оксидов, которые, как было показано в 1980-х годах, обладают свойствами высокотемпературных сверхпроводников; что в связи с развитием электроники вещества высокой чистоты попадут в группу самых важных и трудных объектов химического анализа.

Растет и число задач, которые нужно решать при анализе и контроле как «классических», так и постоянно появляющихся новых объектов. Одна из них — увеличение числа компонентов, которые требуется обнаруживать и определять. Для ее решения потребовалась разработка новых методов анализа. Так, атомно-эмиссионная спектроскопия с индуктивной связанной плазмой (ИСП) сделала обычным анализ одновременно 30–40 элементов, а масс-спектрометрия с той же ИСП обеспечивает возможность определять с большой чувствительностью сразу 60 элементов. Газовая хроматография с капиллярными колонками позволяет обнаруживать, а иногда и определять содержание нескольких сотен компонентов в объектах исследования (например,

более 400 компонентов в запахе кофе). Такого рода задачи отнюдь не исчерпаны, они будут появляться вновь и вновь.

В последнее время возросла потребность в локальном (распределительном) анализе — в противовес валовому, поскольку во многих объектах определяемые компоненты распределены неомогенно и неравномерно по глубине. Необходимость решения таких задач привела к созданию сложных и дорогих инструментальных методов — электронного зонда, рентгеноэлектронной и Оже-спектроскопии, некоторых вариантов масс-спектрометрии. В дальнейшем можно только ожидать увеличения числа задач распределительного анализа.

В технике, криминалистике, археологии, искусствоведении и в ряде других областей постоянно возникают задачи, требующие проведения анализа образцов без их разрушения (вещественная улика, археологическая находка, картина средневекового художника), чтобы объект мог и далее функционировать, если это нужно. Сейчас для таких целей используют рентгенофлуоресцентный анализ, радиоактивационный метод (при условии, что образуются короткоживущие радиоизотопы), ИК-спектроскопию или методы, вызывающие микроскопические разрушения (электронный зонд, иногда атомно-эмиссионный анализ). Здесь неспасательный край работы; нужны новые оригинальные методы, по возможности простые и недорогие.

Чем дальше, тем больше растет потребность в непрерывном анализе (например, в анализе морской воды по ходу судна в режиме реального времени или руды на ленте транспортера), а также в дистанционном анализе (особенно в контроле технологических процессов с участием радиоактивных и высокотоксичных веществ или при изучении космических объектов). Здесь успешно используются спектроскопические и электрохимические методы. Однако до сих пор существуют труднорешаемые задачи дистанционного анализа (или вовсе не решаемые), а завтра их будет еще больше.

Аналитическая химия на протяжении всей своей истории старалась решать задачи повышения чувствительности, точности анализа, обеспечения его селективности, быстроты и решала их, в общем, успешно. Сейчас, похоже, нет нужды в ультраточных методах; достигаемая точность в большинстве случаев достаточна. Однако практические потребности все время меняются, и аналитик-исследователь должен работать на опережение, создавая чрезвычайно точные методы анализа.

Вместе с тем не всегда необходимо определять так много конкретных, отдельных веществ. Иногда достаточно найти общий параметр (обобщенный показатель), интегрирующий влияние всей гаммы компонентов. Например, в природных водах, предназначенных для потребления, могут присутствовать фенолы. Эти вещества неприятны сами по себе, но особенно опасны токсичные хлорорганические соединения, образующиеся с их участием при хлорировании воды. Пытаться обнаружить все возможные фенолы (нитрофе-

нолы, крезолы и т.д.) и тем более определить содержание каждого — задача, как минимум, очень трудоемкая; но есть возможность провести групповую реакцию на все фенолы сразу и определить их наличие и общее содержание, если они присутствуют. Такой параметр называют фенольным индексом — это очень простой пример обобщенного показателя. Степень загрязненности воды окисляющимися веществами можно оценить с помощью обобщенного показателя, называемого химическим потреблением кислорода (ХПК); его определяют по расходу окислителя (обычно бихромата). Этот расход пропорционален степени загрязненности воды органическими веществами. Определяют также сумму тяжелых металлов, суммарное содержание полиароматических углеводородов. Если такие определения дают положительный результат, то в случае необходимости можно заняться определением индивидуальных соединений.

При массовости анализа для экономии труда, времени и реактивов часто используют скрининг — двухступенчатый анализ, на первом этапе которого отбраковываются пробы, не содержащие искоемых компонентов. Отрицательный результат (отсутствие компонента) считается окончательным, и к соответствующим пробам больше не возвращаются. «Положительные» пробы далее исследуют более основательно. При реализации такого подхода на первой стадии могут быть использованы упрощенные и относительно дешевые методы, например тест-методы.

Обеспечению массовости анализа способствует также унификация применяемых методик. Тщательно отобранные, многократно проверенные и «отлаженные» методики облегчают проведение анализов. Высшей стадией унификации является стандартизация; если использование унифицированных методик обычно только рекомендуется, то применение стандартизированных методик становится часто обязательным.

Повышению производительности аналитической службы служат автоматизация и компьютеризация анализа. Так, внедрение в агрохимических лабораториях поточных аналитических линий, использование так называемого непрерывного проточного анализа резко увеличило число анализируемых образцов.

По мере развития методов анализа и средств их осуществления нужда в лабораторном анализе уменьшается: приборы становятся компактными, транспортабельными, методы — подчас безреагентными (как, скажем, рентгенофлуоресцентный анализ). Более того, есть анализы, которые в принципе нельзя проводить в условиях лабораторий (например, дистанционный анализ космических объектов), и анализы, которые бессмысленно проводить в лаборатории (например, определять СО в выхлопных газах автомобилей или метан в угольных шахтах).

Недавно наметился еще один новый подход к анализу — использование приемов хемометрики. Это область науки, пограничная между химией (прежде всего аналитической) и математикой, а также теорией информации. Например, при анализе сложных смесей очень эффективным оказывается хемометрический подход, называемый распознаванием образов. В этом случае меняется сама парадигма химического анализа, здесь мы вообще отказываемся от «компонентного анализа».

Начиная с середины XX века, непрерывно шел процесс вытеснения классических химических методов анализа инструментальными методами, основанными на привлечении физических явлений, физико-химических закономерностей, достижений электроники, математики, информатики, а также биохимии, иммунологии и других наук биологического цикла. В настоящее время абсолютное большинство реальных анализов осуществляется именно такими методами. Если в 1951 г. основными методами анализа, использо-

ванными при аттестации широко известных и повсеместно применяемых стандартных образцов геологических объектов, были гравиметрические, титриметрические и колориметрические методы, то в 2004–2005 гг. на первое место вышли рентгенофлуоресцентные и масс-спектрометрические методы.

Значение и распространенность тех или иных методов — величины, меняющиеся во времени и «пространстве» (в разных странах). Выбор методов определяется подчас не только их аналитическим потенциалом, пригодностью для решения именно данных задач, но и привходящими обстоятельствами, иногда очень существенными. Это финансовые возможности, наличие соответствующих специалистов, имеющихся площади, просто традиции и даже убеждения.

В последние годы все чаще стали применять гибридные методы анализа, прежде всего это относится к комбинации методов разделения и определения. Среди них капиллярный электрофорез и практически вся современная хроматография, сочетающая хроматографическую колонку и детектор, задача которого — непрерывные определения. К гибридным методам относится также проточно-инжекционный анализ, только здесь вместо колонки используется блок пробоподготовки (включая устройства для ввода реагентов и осуществления химических реакций и часто для концентрирования определяемого компонента).

Заметна тенденция к миниатюризации анализа и аналитических систем. Вообще говоря, в свое время довольно быстро осуществился переход от макроанализа («мокрого» химического анализа) к полумикро- и микроанализу, а в середине прошлого столетия были разработаны методы и техника ультрамикрхимического неорганического анализа под микроскопом и электрохимического анализа в биообъектах, включая отдельную клетку. К самым перспективным достижениям последних лет следует отнести попытку размещения многофункциональных приборов на микрочипах (особенно это относится к капиллярному электрофорезу и отчасти к проточно-инжекционному анализу). Здесь еще много проблем, особенно в создании миниатюрных детекторов, но и будущее просто захватывающее. Уже созданы минианализаторы карманного типа для определения одного и, реже, нескольких веществ (например, анализаторы газов). Методика определения обычно уже «защита» в приборе, не требуется и градуировка. Управление прибором — простейшее; иногда просто нужно нажать одну кнопку и увидеть результат анализа на дисплее. Первыми приборами такого типа были, вероятно, рН-метры.

Однако имеется и противоположная тенденция — разработка и выпуск на рынок усложненных многофункциональных приборов-комбайнов, реализующих подчас не один, а два или несколько близких методов анализа. В качестве примера можно привести устройства для анализа и изучения поверхности. В них могут быть реализованы рентгеноэмиссионный микроанализ (электронный зонд), рентгено(фото)-электронная, Оже-спектроскопия и даже масс-спектрометрия вторичных ионов. Это громоздкие и очень дорогие приборы. Следует отметить, что промышленность аналитических приборов — одна из самых динамично развивающихся в мире отраслей.

Существенной проблемой является формулирование правильной политики в деле оснащения лабораторий. В условиях финансовых затруднений и высокой стоимости сложных, особенно многофункциональных приборов жизненной необходимостью надо считать их коллективное приобретение, обслуживание и использование.

В заключение еще раз перечислим основные тенденции развития аналитической химии в настоящее время:

— миниатюризация анализа, в частности разработка универсальных аналитических приборов и простых анализа-

торов на микроэлектронных чипах с использованием микрофлюидных и других систем;

— интенсивное развитие методов и средств внелабораторного («полевого») химического анализа; в частности, создание эффективных и простых в использовании инструментальных средств оперативного обнаружения взрывчатых веществ и наркотиков;

— использование достижений математики и теории информации (хеометрики) для перехода от обычного «покомпонентного» анализа к оценке обобщенных показателей, к распознаванию образов; создание экспертных систем; развитие «электронного носа» и «электронного языка»; разработка приемов многопараметрического градуирования;

— дальнейшее развитие методов и средств распределительного (локального), непрерывного (в потоке), дистанционного и неразрушающего анализов;

— создание принципиально новых средств химического анализа, основанных на использовании нанотехнологий, в том числе разработка непрерывно действующих химических сенсоров;

— расширение исследований по совершенствованию анализа биомедицинских объектов;

— отыскание новых принципов генерации аналитического сигнала (в частности, использование твердотельных химических сенсоров — полупроводниковых, акустических и многих других);

— дальнейшее развитие и совершенствование спектроскопических, масс-спектрометрических, хроматографических, электрохимических и других методов анализа, а также специальных методов анализа поверхности.

В последние годы наблюдается тенденция ухода от привычного термина «аналитическая химия» к термину «аналитика». Разумеется, это не случайно. Содержание аналитической химии сильно изменилось. Это давно уже не только химия, но и междисциплинарная наука, часть не только химии, но и физики. В значительной степени наука о химическом анализе опирается на математику, теорию информации и на науки биологического цикла. Среди аналитиков сейчас много физиков и инженеров, особенно среди тех, кто занимается спектроскопическими и ядерно-физическими методами анализа. Они аналитики, но не химики.

Настоящий выпуск журнала «Успехи химии» посвящен современному состоянию отдельных методов химического анализа, так как в одном выпуске журнала нельзя рассмотреть все методы. Так, вопросам хеометрики посвящен обзор О.Е.Родионовой и А.Л.Померанцева «Хеометрика: достижения и перспективы». Спектрометрическим методам анализа посвящены обзоры А.А.Большакова с соавт. «Перспективы аналитической атомной спектрометрии» и А.Х.Гильмутдинова с соавт. «Атомно-абсорбционная спектрометрия с пространственным разрешением». В обзоре В.Г.Семенова с соавт. обсуждены перспективы применения мёссбауэровской спектроскопии в химическом анализе. Обзор Я.И.Яшина и А.Я.Яшина «Аналитическая хроматография. Методы, аппаратура, применение» посвящен современному состоянию хроматографических методов анализа. И, наконец, в обзоре С.Б.Саввина с соавт. рассмотрены методы модифицирования органических реагентов для спектрофотометрического анализа.

Академик Ю.А.Золотов